

亚禁带光照对 CdZnTe 晶体中 晶界电场分布的影响*

陈伟龙 郭榕榕[†] 仝钰申 刘莉莉 周圣岚 林金海

(厦门理工学院光电与通信工程学院, 福建省光电技术与器件重点实验室, 厦门 361024)

(2022 年 5 月 7 日收到; 2022 年 7 月 7 日收到修改稿)

晶界是限制 CdZnTe 核辐射成像探测器大面积应用的主要缺陷之一. 为了探究改善晶界附近电场分布特性的方式, 本文采用 Silvaco TCAD 从理论上研究了亚禁带光照对于含晶界 CdZnTe 探测器内电场分布的影响. 仿真结果表明, 在无偏压下, 亚禁带光照能使得晶界势垒降低, 从而减小对载流子传输的阻碍作用. 在外加偏压下, 亚禁带光照使得晶界引起的电场死区消失, 使其电场分布趋向于线性分布. 同时研究了不同波长和不同强度的亚禁带光照对于晶界电场分布的影响, 结果表明光强低于 1×10^{-9} W/cm² 时, 亚禁带光照对于 CdZnTe 晶体的电场无调节作用. 而在波长 850 nm, 光强 1×10^{-7} W/cm² 的亚禁带光照下, 实现了更平坦地电场分布, 因此可有效地提高器件的载流子收集效率. 仿真结果为调节晶界电场分布提供了理论指导.

关键词: CdZnTe, 晶界, Silvaco, 亚禁带光照

PACS: 61.72.uj, 61.72.-y, 85.25.oj, 78.56.Cd

DOI: 10.7498/aps.71.20220896

1 引言

由于高阻的 CdZnTe 优异性能, 在核安全、环境监测、天体物理学和医学成像等领域的潜在应用而受到广泛关注^[1-5]. 然而, 由于晶体生长和电极接触特性中固有的结晶复杂性, 载流子传输特性和探测器的性能不太令人满意. 扩展缺陷, 如晶界、位错和 Te 夹杂物, 是不可避免的, 这限制了大尺寸探测器的应用^[6-9]. 在以往的研究中, 在 CdZnTe 晶体中观察到孪晶界和小角晶界^[10,11]. 结果表明, 晶界可能形成漂移载流子的潜在势垒^[12]. 同时, 也有一些关于 CdZnTe 探测器电场分布的研究. Li 等^[13]在 CdZnTe 探测器内发现晶界两侧存在不均匀的电场. Dong 等^[14]利用 Pockels 技术观察了孪晶界附近的电场分布特性, 发现畸变电场是激光诱导的瞬态光电流信号突然增大的原因. 因此如何改善含

晶界的 CdZnTe 晶体的电场分布以及如何提高器件性能是一个值得进一步研究的问题.

外加光照条件是 CdZnTe 探测器重要的外在影响因素之一. 引入红外光照能够提高 CdZnTe 载流子的迁移率寿命积^[15]. Ivanov 等^[16]的研究发现将 CdZnTe 探测器置于红外光照下, CdZnTe 探测器的性能得到了提升. Washington 等^[17]的研究发现, 亚禁带光照对 CdZnTe 晶体的内电场分布有明显影响, 可能与深能级缺陷载流子的占据状态有关. 虽然 CdZnTe 探测器在亚禁带光照下的研究有很多结果, 但亚禁带光照对含晶界 CdZnTe 探测器的空间电荷分布机制以及如何操纵内部电场以获得良好的探测器性能仍缺乏系统的认识. 因此本研究的目的是通过 Silvaco TCAD 建立仿真模型, 探究亚禁带光照下对含晶界的 CdZnTe 晶体的空间电荷分布和电场分布影响, 从而揭示亚禁带光照对晶界附近电场分布的内在调控机制及

* 福建省自然科学基金 (批准号:2020J05239) 和国家自然科学基金青年科学基金 (批准号:51702271) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: guorr2020@163.com

寻找一个合适的光照条件来提高 CdZnTe 探测器的性能。

2 建模

Silvaco TCAD 是对半导体特性进行设计和仿真的计算机辅助系统. Au 电极与 CdZnTe 接触形成 MSM 型 Au/CdZnTe/Au 核辐射探测器广泛应用于实验与仿真研究^[18,19]. 本文采用 Silvaco TCAD 对 Au/CdZnTe/Au 结构的探测器进行 (2D) 数值模拟, 仿真的 CdZnTe 晶体为 N 型半导体. 本次仿真采用三能级补偿模型^[20], 考虑晶体基体内部存在浅施主, 浅受主以及深施主能级. 其中, 定义浅施主能级的浓度为 $1.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, 浅受主能级的浓度为 $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, 且浅施主与浅受主能级在室温下全电离. 普遍认为掺 In 的 CdZnTe 晶体中, 深施主能级 ($\text{Te}_{\text{Cd}}^{++}$) 能级位置为 $E_V + 0.86 \text{ eV}$ ^[21]. 电子亲和能为 4.3 eV . Au 的功函数为 5.1 eV , Au 与 N 型 CdZnTe 接触会形成肖特基势垒, 造成一定的能带弯曲. 仿真具体的参数如表 1 和表 2 所示.

晶界具有广泛的深能级陷阱态分布, 已被实验证实并应用于 Si, ZnO, GaAs 等多种材料的仿真研究^[22]. 在 Si 晶体的仿真模型中, 晶界被认为是一个二维界面和缺陷集中层^[23], 同样地在 GaAs 太阳能电池和 ZnO 的晶界仿真中, 缺陷态被引入晶界^[24,25]. 这些结构缺陷在晶界中包括悬挂键、弱键和点缺陷, 形成高密度陷阱包含带尾态和深能级态的能带. 当这些陷阱被填充时, 会形成一个势垒并阻碍载流子的传输^[26].

基于以往对于晶界的仿真研究, 本次仿真考虑 CdZnTe 晶体中存在 $2 \mu\text{m}$ 的晶界, 具体结构如图 1 所示, 在 CdZnTe 晶界中引入了带尾态和深能级态. CdZnTe 晶体基体的深能级缺陷参数见表 2 所示.

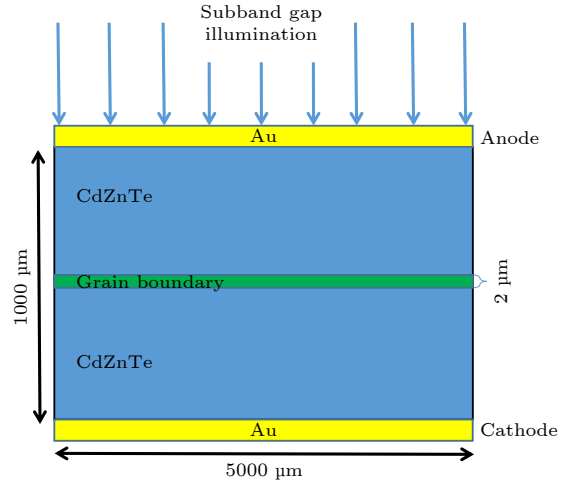


图 1 Au/CdZnTe/Au 器件结构图
Fig. 1. Au/CdZnTe/Au device structure schematic.

CdZnTe 晶体的晶界缺陷参数见表 3. 将 CdZnTe 晶界缺陷 $E_V + 0.75 \text{ eV}$ 定义为深能级受主^[27,28], 考虑为晶界的主要缺陷. 同时, 在仿真模型^[29,30]中考虑了 $\text{In}_{\text{Cd}}\text{-V}_{\text{Cd}}$ ($E_V + 0.14 \text{ eV}$) 和 Cd_{Te} ($E_C - 0.10 \text{ eV}$) 等缺陷, 这些缺陷在仿真过程中完全电离. 采用波长 890 nm , 光强为 $1 \times 10^{-8} \text{ W/cm}^2$ 的亚禁带光照从 CdZnTe 阳极入射, 其参数见表 4. 890 nm 的亚禁带光在 CdZnTe 晶体中的穿透深度为 4.6 mm , 大于本文 CdZnTe 晶体的厚度^[31-34].

表 1 CdZnTe 晶体的基本参数^[35]
Table 1. Basic parameters of CdZnTe crystal^[35].

Parameters	Value	Parameters	Value
Band gap/eV	1.6	Dielectric constant	10.9
Conduction band density/ cm^{-3}	9.14×10^{17}	Optical recombination rate/ $(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	1.5×10^{-10}
Valence band density/ cm^{-3}	5.19×10^{18}	Electronic auger coefficient/ $(\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1})$	5×10^{-30}
Electron mobility/ $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$	1000	Hole Auger coefficient/ $(\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1})$	1×10^{-31}
Hole mobility/ $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$	100	Acceptor band tail state/ $(\text{cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1})$	7.5×10^{14}
Donor band tail state/ $(\text{cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1})$	7.5×10^{14}		

表 2 CdZnTe 晶体基体能级的基本信息^[21]
Table 2. Basic information of the energy levels in the CdZnTe crystal matrix^[21].

Level position/eV	Type	Density/ cm^{-3}	Electron capture cross section/ cm^2	Hole capture cross section/ cm^2
$E_V + 0.86$	Donor	5×10^{11}	3×10^{-14}	3×10^{-15}

表 3 CdZnTe 晶体晶界能级的基本信息^[27-30]
Table 3. Basic information of energy levels in the grain boundary of CdZnTe crystal^[27-30].

Level position/eV	Type	Density /cm ⁻³	Electron capture cross section/cm ²	Hole capture cross section/cm ²
$E_C - 0.10$	Donor	1×10^{12}	1.2×10^{-15}	1.2×10^{-16}
$E_V + 0.14$	Acceptor	1×10^{12}	2.5×10^{-15}	2.5×10^{-16}
$E_V + 0.75$	Acceptor	5×10^{12}	3×10^{-14}	3×10^{-15}

表 4 890 nm 亚禁带光照参数^[31-34]
Table 4. Basic parameters of 890 nm sub-bandgap illumination^[31-34].

Wavelength/nm	Extinction coefficient k	Refractive index n	Absorption coefficient/cm ⁻¹
890	1.417×10^{-4}	2.9196	10

3 仿真结果与讨论

3.1 无偏压下亚禁带光照的影响

为探究无偏压下, 亚禁带光照对于含晶界的 CdZnTe 晶体中的电场分布和空间电荷分布的影

响, 采用光强为 $1 \times 10^{-8} \text{ W/cm}^2$, 波长为 890 nm 的亚禁带光照从晶界缺陷 $E_V + 0.75 \text{ eV}$ 浓度 $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 阳极入射. 图 2(a) 显示了在无光照和在亚禁带光照下的 CdZnTe 晶体内部的电子浓度分布. 由图 2(a) 可知, 无光照下, 晶界处和电极接触处的电子浓度较低. 由于晶界处深受主缺陷俘获电子, 因此, 晶界处的电子浓度较低. 而电极接触处的电子浓度较低是由于金属半导体的功函数不一样所导致的. N 型 CdZnTe 晶体与金属 Au 接触时, 由于金属 Au 的功函数大于半导体 CdZnTe 功函数. 因此, 电子从 CdZnTe 流到金属中, 金属侧聚集负电荷, 半导体侧聚集正电荷, CdZnTe 电极接触处的电子浓度低于体内的电子浓度, 同时 CdZnTe 积累的正电荷从表面延伸到内部一定厚度, 形成空间电荷区. 结果, 在阳极和阴极附近形成内部电场, 其方向从半导体指向到金属, 造成一定的能带弯曲. 当采用亚禁带光照射时, CdZnTe 晶体内的电子浓度升高, 这是由于亚禁带光照的入射使得 CdZnTe 晶体更多的电子跃迁至

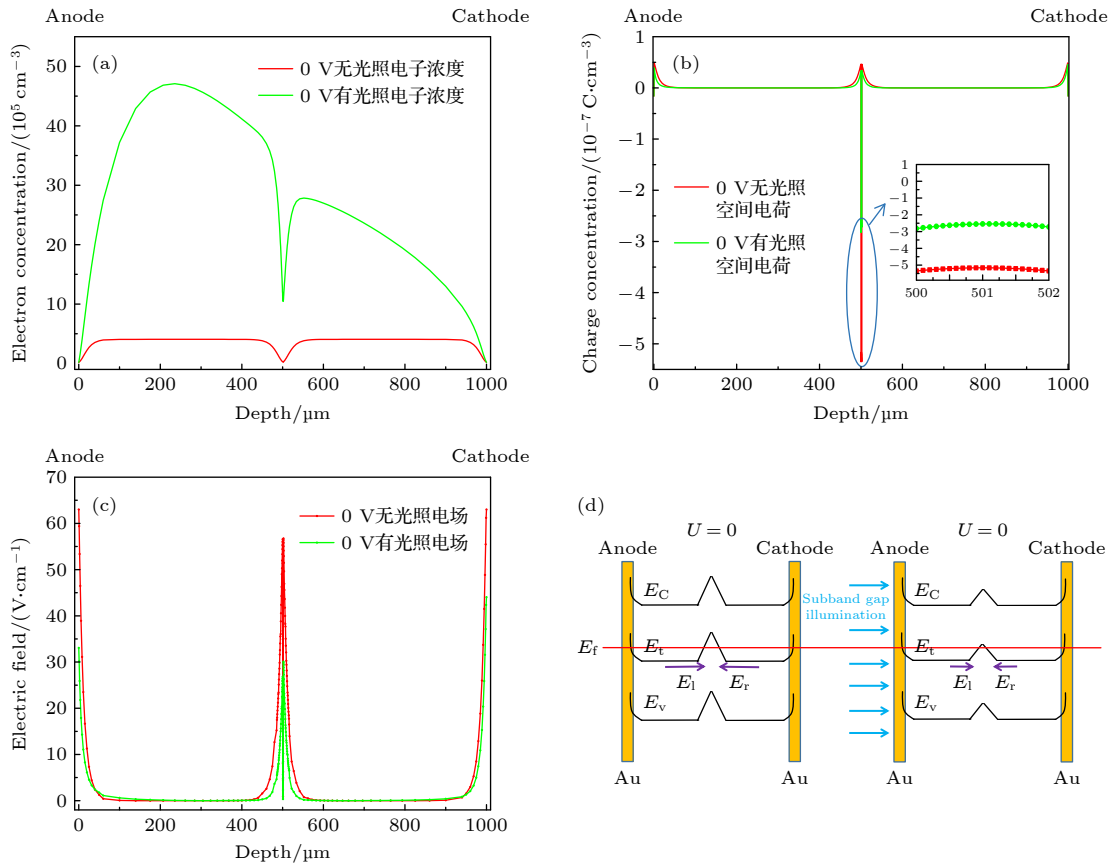


图 2 无偏压下有光照的 Au/CdZnTe/Au 器件仿真结果 (a) 电子浓度分布; (b) 空间电荷分布; (c) 电场分布; (d) Au/CdZnTe/Au 能带结构图

Fig. 2. Simulation results of Au/CdZnTe/Au device with and without illumination under unbiased voltage: (a) Electron concentration distribution; (b) space charge distribution; (c) electric field distribution; (d) energy band structure diagram of Au/CdZnTe/Au.

导带, 并且由于是从阳极入射, 因此晶界左侧的电子浓度高于晶界右侧电子浓度. 图 2(b) 所示是有无光照的 CdZnTe 晶体空间电荷分布, 在亚禁带光照射下晶界处的空间电荷浓度相比于无光照时降低, 晶界及其晶界两侧的空间电荷均减小, 这可能是由于在亚禁带光照下载流子在晶界处的深能级的占有概率发生了变化. 亚禁带光照使得被俘获至晶界深主能级的电子发生去俘获跃迁至导带, 因此电子在晶界处的深主能级占有概率减小, 深主能级的电离减小, 空间电荷浓度降低.

图 2(c) 显示了无光照和亚禁带光照下的 CdZnTe 晶体内部的电场分布, 由于晶界处的负空间电荷及晶界两侧的正空间电荷分布, 在晶界两侧形成了内电场, 晶界左侧内电场方向与晶界右侧电场方向相反, 因此在晶界及晶界两侧形成了中间低两边高的电场分布. 在亚禁带的光照下, 由于晶界及其晶界两侧的空间电荷浓度降低, 晶界两侧的电场强度相对于无光照降低. 因此在亚禁带光照下 CdZnTe 晶体的晶界对于载流子的阻碍作用下降. 图 2(d) 所示是提取的无偏压下 CdZnTe 晶体的能带图, 图 2(d) 左图是没有光照的 CdZnTe 晶体能带图, 图 2(d) 右图是在亚禁带光照照射下的 CdZnTe 晶体能带图, 相比于无光照的能带势垒, 在亚禁带光照下, 晶界处的能带势垒降低, 这与对电场的讨论一致, 在亚禁带光照下晶界对于载流子的阻碍作用下降.

3.2 外加偏压下亚禁带光照的影响

在 100 V 外加偏压下, 对晶界缺陷 $E_V+0.75$ eV 浓度分别为 $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 与 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 晶体建立了仿真模型. 其电场分布如图 3(a) 所示, 晶界缺陷浓度 $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 晶体其内电场分布呈线性分布, 而晶界缺陷浓度 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 晶体内部的电场在晶界右侧形成了死区, 需要指出的是, 死区对光生载流子的输运有较大的影响. 在死区中, 扩散是载流子唯一的驱动力. 这就增大了载流子在到达电极的路上被复合的概率, 从而使探测器的对载流子收集效率降低.

根据 3.1 节所述亚禁带光照具有调节能带势垒的作用. 为了探究在外加偏压下亚禁带光照对于晶界缺陷浓度 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 晶体内部空间电荷及内电场分布特性, 在外加偏压 100 V 下, 采用光强为 $1 \times 10^{-8} \text{ W/cm}^2$, 波长为 890 nm 的光照从 CdZnTe 阳极入射. 图 3(a) 所示为亚禁带光

照下, CdZnTe 的电场畸变变小, 电场死区减小. 这可能是由于 CdZnTe 空间电荷分布变化所导致的. 图 3(b) 是外加偏压下 CdZnTe 晶体空间电荷分布, 晶界的空间电荷浓度远远高于晶界外的空间电荷浓度, 在亚禁带光照下, 晶界的空间电荷浓度下降, 所形成的内建电场减小, 因此电场的畸变变小. 图 3(c) 是 CdZnTe 晶体晶界外的空间电荷分布, 在无光照条件下, 晶界缺陷浓度 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 和晶界缺陷浓度 $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 空间电荷分布相比. 在外加偏压下, 晶界缺陷浓度 $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 能带发生倾斜, 费米能级相对能带下移, 靠近阴极下移越多, 深主能级电离越多, 因此形成从阴极到阳极逐渐减少的空间电荷分布. 当晶界缺陷浓度增大至 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 会使得晶界右侧的空间电荷浓度几乎为零, 导致晶界右侧的电场强度低, 因此形成了载流子的死区. 然而在亚禁带光照下, 空间电荷浓度发生了变化, 在晶界右侧的空间电荷浓度增大, 电场死区减小. 这可以用改进的 SRH (Shockley-read-hall) 复合模型进行解释^[36, 37]. 改进的 SRH 模型描述了载流子在缺陷能级上的 6 个光电跃迁过程的相对平衡, 如图 3(e) 所示: (1-2) 导带电子 (价带空穴) 被缺陷能级俘获; (3-4) 电子 (空穴) 从缺陷能级到导带 (价带) 的热激发; (5-6) 电子 (空穴) 从缺陷能级到导带 (价带) 的光电离过程^[38]. 因此在亚禁带光照下载流子在深能级上的占据状态改变. 当这些光电跃迁过程达到稳定的平衡状态时, 在晶界左侧载流子更多地占据深主能级, 电离概率减小. 在晶界右侧载流子, 更多被激发至导带, 电离概率增强. 相比于无光照下, 亚禁带光照下晶界左侧的空间电荷浓度减小, 晶界右侧的空间电荷浓度增大. 提取了深主能级的电离密度, 如图 3(d) 所示, 与上述讨论一致. 因此亚禁带光照对于载流子占据深能级的占据状态具有调节作用. 仿真结果表明, 亚禁带光照调节能够使得高晶界缺陷浓度 CdZnTe 晶体的深主电离密度向着低晶界缺陷浓度的 CdZnTe 晶体的深主电离密度变化, 因此改善电场分布.

3.3 不同亚禁带光照对电场分布的影响

上节论述表明通过亚禁带光照能改善含晶界的 CdZnTe 晶体内部电场分布, 为了寻找一个合适的亚禁带光照更好地改善 CdZnTe 内部电场分布, 本文在 100 V 偏压下分别探究不同强度和不同

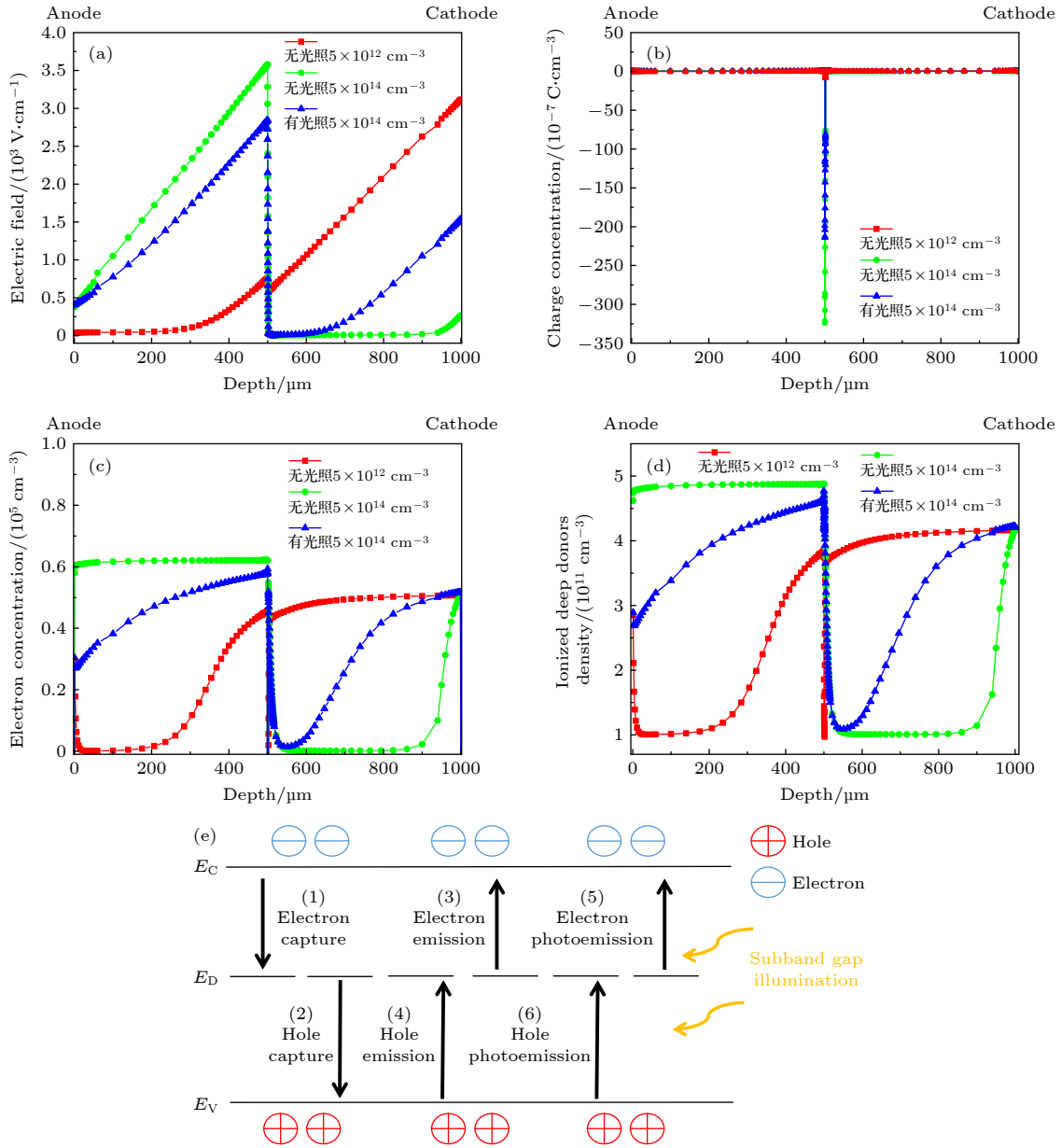


图 3 100 V 偏压下有与无光照的 Au/CdZnTe/Au 器件仿真结果 (a) 电场分布; (b) 空间电荷分布; (c) 正空间电荷分布; (d) 深施主电离密度; (e) SRH 模型^[36-37]

Fig. 3. Simulation results of Au/CdZnTe/Au device with and without illumination under 100 V bias voltage: (a) Electric field distribution; (b) space charge distribution; (c) positive space charge distribution; (d) deep donor ionization density; (e) SRH model^[36-37].

波长的亚禁带光照对于含晶界 CdZnTe 晶体的内部电场影响. 不同波长和强度的亚禁带光照的选取仿真参数如表 5 所示.

表 5 不同波长的亚禁带光照参数^[31-34]

Table 5. Basic parameters of different wavelengths sub-bandgap illumination^[31-34].

Wavelength/ nm	Extinction coefficient k	Refractive index/ n	Absorption coefficient/ cm^{-1}
850	2.707×10^{-4}	2.9511	40
890	1.417×10^{-4}	2.9196	10
940	3.540×10^{-5}	2.8796	5

使用强度 $1 \times 10^{-8} \text{ W/cm}^2$, 波长分别为 850 nm, 890 nm, 940 nm 的亚禁带光照从晶界缺陷浓度为 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 阳极入射. 波长分别为 850 nm, 890 nm 和 940 nm 的亚禁带光在 CdZnTe 晶体中的穿透深度分别为 1.2 mm, 4.6 mm 和 9.2 mm, 均大于 CdZnTe 晶体的厚度^[31,32]. 其电场分布如下图 4(a) 所示, 850 nm 的光照下, 死区的电场改善最大, 晶界电场畸变最小. 因此对于不同亚禁带波长, 850 nm 波长的亚禁带光照对于 CdZnTe 的电场改善最大.

同样使用波长为 850 nm, 强度为 $1 \times 10^{-7} \text{ W/cm}^2$, $1 \times 10^{-8} \text{ W/cm}^2$, $1 \times 10^{-9} \text{ W/cm}^2$ 的亚禁带光照, 从晶界缺陷浓度为 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 的 CdZnTe 阳极入射. 其电场分布如图 4(b) 所示, $1 \times 10^{-9} \text{ W/cm}^2$ 的光照强度下, 电场分布没有变化, 依旧存在着死区, 而随着光照强度的增大, 对电场的改善增强. 在强度 $1 \times 10^{-7} \text{ W/cm}^2$ 的情况下, 电场的死区减小, 电场畸变最小.

正如上述所讨论, 亚禁带光照使得电子在晶界左侧的深施主能级的占有概率增大, 晶界右侧的深施主能级占有概率减小, 从而晶界左侧的电离概率减小, 空间电荷浓度下降, 晶界右侧的电离概率增

大, 空间电荷浓度增大. 在亚禁带光照波长为 850 nm, 光强为 $1 \times 10^{-7} \text{ W/cm}^2$ 时, 可以进一步改善电场分布, CdZnTe 晶体内有一个更平坦的内部电场.

根据上述讨论, 为了便于理解亚禁带光照对晶界电场分布的调节作用, 本文总结提出了如下能带模型. 图 5(a) 是热平衡状态下, 含有晶界的 CdZnTe 晶体能带模型, 由于晶界的存在使得在晶界附近形成两个空间电荷区和背靠背的肖特基势垒, 晶界处的能带向上弯曲. 同时金属-半导体接触形成肖特基势垒, 电极附近的能带向上弯曲. 当采用亚禁带光照射时, 能带模型如图 5(b) 所示, 晶界的势垒降

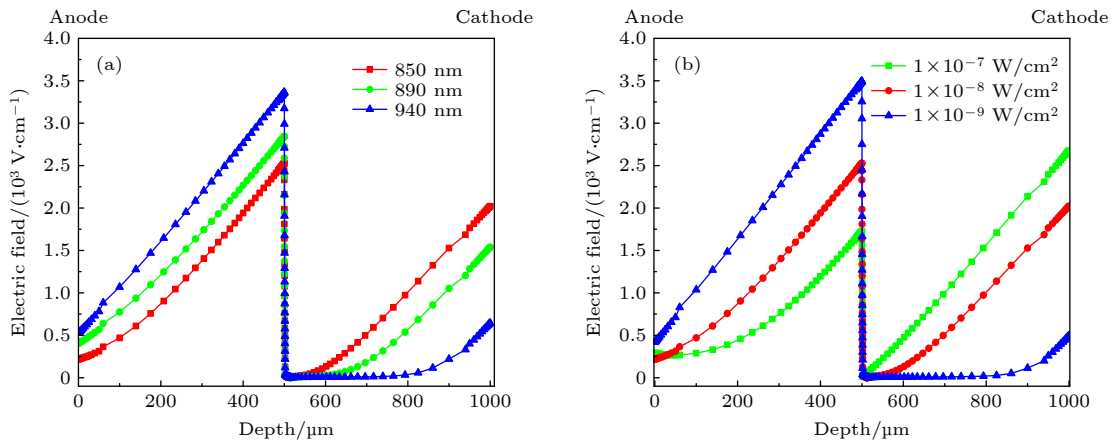


图 4 100 V 偏压下的 Au/CdZnTe/Au 器件仿真结果 (a) 不同波长的亚禁带光照下电场分布; (b) 不同光强的亚禁带光照下电场分布
Fig. 4. Simulation results of Au/CdZnTe/Au device under 100 V bias voltage: (a) Electric field distribution under sub-bandgap illumination with different wavelengths; (b) electric field distribution under sub-bandgap illumination with different intensities.

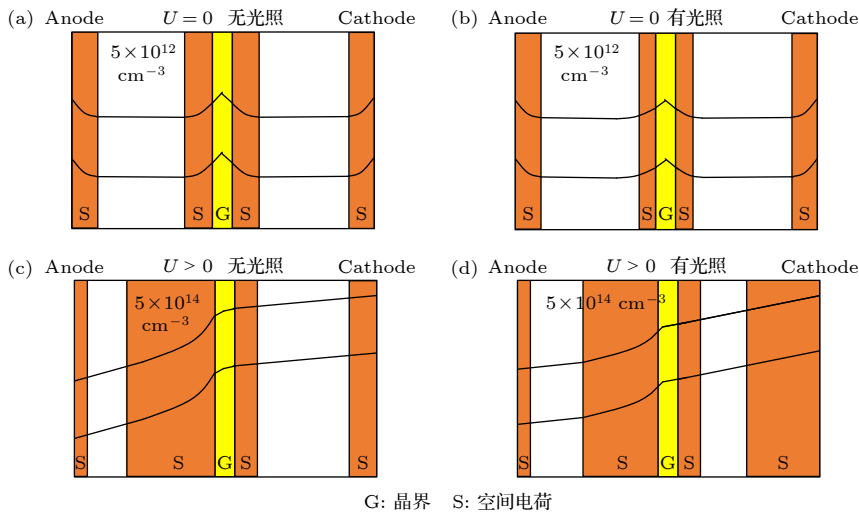


图 5 Au/CdZnTe/Au 器件有无光照的能带模型 (a) 无偏压下无光照能带模型; (b) 无偏压下有光照能带模型 (c) 外加偏压下无光照能带模型 (d) 外加偏压下有光照能带模型

Fig. 5. Energy band model of Au/CdZnTe/Au device with and without illumination: (a) Energy band model without illumination under unbiased voltage; (b) energy band model with illumination under unbiased voltage; (c) energy band model without illumination under applied bias voltage; (d) energy band model with illumination under applied bias voltage.

低. 这是由于亚禁带光的照射, 晶界两侧空间电荷区减小, 所形成的内电场会减小, 因此能带势垒降低. 当外加偏压, 并且将晶界缺陷浓度增大至 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 其能带模型如图 5(c) 所示, 受偏置电压的影响, 能带从阴极向阳极倾斜. 此时, 靠近晶界左侧处的空间电荷区占主要影响, 晶界左侧的能带的倾斜程度较大, 而在晶界右侧的能带近乎于平带, 电场出现死区. 载流子在死区中只能通过扩散进行运输, 因此探测器的收集效率将有所降低. 使用亚禁带光照照射的能带模型如图 5(d) 所示, 亚禁带光照会改变载流子在深能级占有概率, 电子在晶界左侧的深施主能级占有概率增大, 电离减小, 能带倾斜变缓, 电子在晶界右侧的深施主能级占有概率减小, 电离增大, 晶界右侧的能带不再是近乎于平带, 而是趋向于线性, 电场死区消失, 形成更平坦的电场分布. 载流子可以通过漂移的方式进行运输, 降低在传输过程中被缺陷俘获或复合的概率, 从而提高探测器的电荷收集效率.

4 结 论

本文使用 Silvaco TCAD 仿真了亚禁带光照对含晶界的 CdZnTe 探测器的空间电荷分布与内电场分布的影响. 仿真结果表明, 无偏压下, 亚禁带光照能够降低能带势垒, 因此减小对载流子传输的阻碍作用. 在 100 V 偏压下, 亚禁带光照通过改变载流子占据深能级的概率, 减小了高晶界缺陷浓度的电场死区和电场畸变. 采用不同亚禁带光照照射 CdZnTe 晶体, 当亚禁带光照波长为 850 nm 光强为 $1 \times 10^{-7} \text{ W/cm}^2$ 时, 可以进一步改善电场分布, CdZnTe 晶体内有一个更平坦的内部电场, 这大大降低了载流子在电荷传输过程中被缺陷俘获或复合的概率, 从而显著提高了探测器的电荷收集效率. 但当光强小于 $1 \times 10^{-9} \text{ W/cm}^2$ 的时候, 亚禁带光照不能改善电场分布. 在此基础上, 本文提出了亚禁带光照对晶体内部电场分布调节的内在机制, 以及有无亚禁带光照条件下含晶界 CdZnTe 晶体的能带模型. 无偏压下晶界及电极处的能带向上弯曲. 外加偏压使得能带从阴极向阳极倾斜, 通过亚禁带光照能够降低晶界能带势垒, 调节晶界两侧能带.

参考文献

[1] Johns P M, Nino J C 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 40902

- [2] Kathalingam A, Valanarasu S, Ramesh S, Kim H S, Kim H S 2021 *Sol. Energy*. **224** 923
- [3] Li Y R, Wu S, Guo Y, Xi S Z, Fu X, Zha G Q, Jie W Q 2019 *Infrared Laser Eng.* **48** 1016001 (in Chinese) [李颖锐, 吴森, 郭玉, 席守智, 符旭, 查钢强, 介万奇 2019 *红外与激光工程* **48** 1016001]
- [4] Abbene L, Principato F, Gerardi G, Buttacavoli A, Cascio D, Bettelli M, Amade N S, Seller P, Veale M, Fox O, Sawhney K, Zanettini S, Tomarchio E, Zappettini A 2020 *J. Synchrotron Radiat.* **27** 319
- [5] Gao X, Sun H, Yang D, Wangyang P, Zhang C, Zhu X 2020 *Vacuum* **183** 109855
- [6] Chu M, Terterian S, Ting D, Wang C C, Gurgonian H K, Mesropian S 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2728
- [7] Carvalho A, Tagantsev A K, Oberg S, Briddon P R, Setter N 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075215
- [8] Sun S W, Sui S Y, Li H E, Zhou C H, Yu H X, Xu C 2014 *IR. Tech.* **36** 588 (in Chinese) [孙士文, 隋瀚印, 何力, 周昌鹤, 虞慧娴, 徐超 2014 *红外技术* **36** 588]
- [9] Parker B H, Stahle C M, Roth D, Babu S, Tueller J 2001 *Proc. SPIE.* **4507** 68
- [10] Zeng D M, Jie W Q, Wang T, Zhou H 2009 *J. Cryst. Growth* **311** 4414
- [11] Markunas J K, Almeida L A, Jacobs R N, Pellegrino J, Qadri S B, Mahadik N, Sanghera J 2010 *J. Electron. Mater.* **39** 738
- [12] Bolotnikov A E, Babalola S O, Camarda G S, et al. 2009 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **56** 1775
- [13] Li W, Tkaczyk J E, Andreini K W, Cui J, Zhang T, Williams Y, Harding K G, Chen H, Bindley G, Matyi R J 2009 *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record* Orlando, USA, October 24–November 1, 2009 p1658
- [14] Dong J P, Jie W Q, Yu J Y, Guo R R, Teichert C, Gradwohl K P, Zhang B B, Luo X X, Xi S Z, Xu Y D 2018 *Chin. Phys. B.* **27** 117202
- [15] Prokesch M, Szeles C 2010 US Patent 20100078558 A1
- [16] Ivanov V, Dorogov P, Loutchanski A 2011 *International Conference on Advancements in Nuclear Instrumentation, Measurement Methods and their Applications* Ghent, Belgium, June 6–9, 2011 p1
- [17] Washington A L, Teague L C, Duff M C, Burger A, Groza M, Buliga V 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 073708
- [18] Sik O, Grmela L, Elhadidy H, et al. 2013 *J. Instrum.* **8** C06005
- [19] Zhang Y Q, Fu L 2018 *Mater. Sci. Forum* **922** 40
- [20] Prokesch M, Szeles C 2007 *Phys. Rev. B* **75** 245204
- [21] Gul R, Roy U N, James R B 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 115701
- [22] Zhou Y M, He Y G, Lu A X, Wan Q 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3966
- [23] Kong H S, Lee C 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 6122
- [24] Kumari K, Avasthi S 2017 *IEEE 44th Photovoltaic Specialists Conference* Washington, USA, June 25–30, 2017 p251
- [25] Hossain F M, Nishii J, Takagi S, Sugiharad T, Ohtomo A, Fukumura T, Koimura H, Ohno H, Kawasaki M 2004 *Phys. E* **21** 911
- [26] Zhang A, Zhao X R, Duan L B, Liu J M, Zhao J L 2011 *Chin. Phys. B* **20** 057201
- [27] Kim K H, Na Y H, Park Y J, Jung T R, Kim S U, Hong J K 2004 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **51** 3094
- [28] Kim K H, Ahn S Y, An S Y, Hong J K, Yi Y, Kim S U 2007 *Curr Appl. Phys.* **7** 296
- [29] Wei S H, Zhang S B 2002 *Phys. Rev. B* **66** 155211
- [30] Hjelt K, Juvonen M, Tuomi T, Nenonen S, Eissler E E, Bavdaz M 1997 *Phys. Status Solidi.* **162** 747

- [31] Cola A, Farella I 2013 *Sensors* **13** 9414
 [32] Cola A, Farella I, Anni M, Martucci M C 2012 *IEEE Trans. Nucl. Sci* **59** 1569
 [33] Montmorillon L A D, Delaye P, Launay J C, Roosen G 1995 *Opt. Mater.* **4** 233
 [34] Marple D T F 1964 *J. Appl. Phys.* **35** 539
 [35] Schlesinger T E, Toney J E, Yoon H, Lee E Y, Brunett B A, Franks L, James R B 2001 *Mater. Sci. Eng. R* **32** 103
 [36] Hsieh Y K, Card H C 1989 *J. Appl. Phys.* **65** 2409
 [37] Keevers M J, Green M A 1994 *J. Appl. Phys.* **75** 4022
 [38] Xu L Y 2014 *Ph. D. Dissertation* (Xian: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [徐凌燕 2014 博士学位论文 (西安: 西北工业大学)]

Influence of sub-bandgap illumination on electric field distribution at grain boundary in CdZnTe crystals*

Chen Wei-Long Guo Rong-Rong[†] Tong Yu-Shen Liu Li-Li
 Zhou Sheng-Lan Lin Jin-Hai

(Fujian Provincial Key Laboratory of Optoelectronic Technology and Devices, School of Opto-electronic and Communication Engineering, Xiamen University of Technology, Xiamen 361024, China)

(Received 7 May 2022; revised manuscript received 7 July 2022)

Abstract

Grain boundary is one of the main defects, limiting the large-area application of CdZnTe nuclear radiation imaging detectors. In order to explore the ways to improve the electric field distribution properties near grain boundary, the effect of sub-bandgap illumination on the electric field distribution in CdZnTe detector with grain boundary is studied by Silvaco TCAD simulation technique. The grain boundary potential barrier and electric field dead zone are found in simulation results that significantly affect the carrier transport process in CdZnTe detector. The electric field dead zone caused by the grain boundary disappears under the bias of sub-bandgap illumination. Thus the electric field distribution tends to be linear. Meanwhile, the effects of different wavelengths and intensities of sub-bandgap illumination on the electric field distribution at the grain boundary are also investigated. The results show that the electric field of CdZnTe is distorted by sub-bandgap illumination at an intensity lower than 1×10^{-9} W/cm². In contrast, a flatter electric field distribution is achieved at a wavelength of 850 nm and an intensity of 1×10^{-7} W/cm². The carriers can be transported by drifting, reducing the probability of being captured or recombined by defects during transport, thus improving the charge collection efficiency of the detector.

In addition, the microscopic mechanism of the modulation of the electric field distribution by sub-bandgap illumination and the energy band model of CdZnTe crystal containing grain boundary are proposed. Owing to the existence of the grain boundary, two space charge regions are formed near the grain boundary. The energy band at the grain boundary is bent upward. Meanwhile, the metal-semiconductor contact forms a Schottky barrier, and the energy band near the electrode is bent upward. When the bias voltage is applied, the energy band structure of the CdZnTe tends to tilt from the cathode to the anode. The sub-bandgap illumination can lower the energy band barrier at the grain boundary and regulate the energy band on both sides of the grain boundary. It is believed that this discussion will also make some contributions to understanding of the effects of illumination and grain boundary in other types of optoelectronic devices, especially the applications of thin films in solar cells and detectors.

Keywords: CdZnTe, grain boundary, silvaco, sub-bandgap illumination

PACS: 61.72.uj, 61.72.-y, 85.25.oj, 78.56.Cd

DOI: 10.7498/aps.71.20220896

* Project supported by the Natural Science Foundation of Fujian Province, China (Grant No. 2020J05239) and the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51702271).

[†] Corresponding author. E-mail: guorr2020@163.com



亚禁带光照对CdZnTe晶体中晶界电场分布的影响

陈伟龙 郭榕榕 仝钰申 刘莉莉 周圣岚 林金海

Influence of sub-bandgap illumination on electric field distribution at grain boundary in CdZnTe crystals

Chen Wei-Long Guo Rong-Rong Tong Yu-Shen Liu Li-Li Zhou Sheng-Lan Lin Jin-Hai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 226101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220896

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220896>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

温度对小角度对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of the effect of temperature on low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2019, 68(17): 170504 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190051>

取向角对小角度非对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of effect of misorientation angle on low-angle asymmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2020, 69(14): 140504 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200133>

运动晶界与调幅分解相互作用过程的相场法研究

A phase-field study on interaction process of moving grain boundary and spinodal decomposition

物理学报. 2022, 71(7): 078101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211973>

应变诱发四方相小角度对称倾侧晶界位错反应的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of strain-induced square phase low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation reaction

物理学报. 2022, 71(9): 096102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212278>

氦泡在bcc钨中晶界处成核长大的分子动力学模拟

The nucleation and growth of Helium bubbles at grain boundaries of bcc tungsten: a molecular dynamics simulation

物理学报. 2020, 69(4): 046103 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191069>

金属粉末压坯烧结过程的内耗研究

Internal friction characteristics of compacted billet of metal powder in sintering process

物理学报. 2019, 68(12): 126101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190031>